

## 課題名 (タイトル): 光メタマテリアルの電磁場解析

利用者氏名: 田中拓男\*, \*\*

理研での所属研究室名:

\* 田中メタマテリアル研究室

\*\*光量子工学研究領域 フォトン操作機能研究チーム

### 1. 本課題の研究の背景

我々は、光メタマテリアルと呼ばれる波長よりも細かな人工構造を用いて物質の光学特性を制御する疑似光学材料について研究を行っている。メタマテリアルの構造は微細なため、その構造の設計や特性評価を行うためには大規模な電磁気学計算が必要である。特に最近では、立体的な共振器構造を用いて光の入射角度に依存しない等方的な特性を持つメタマテリアルや、金ナノ微粒子を自己組織的に結合させて作製したメタマテリアルを開発しているが、これらは立体的な形状に加えて数ナノメートルスケールのギャップ構造を持つため、その計算機モデルは大規模なものとなる。さらに波長領域においても赤外から紫外域の広い波長範囲にわたってその分光特性を計算する必要があるため、結果として高い計算性能を持った計算機が必要である。このような背景のもと、特に今年度は、複数の金ナノ微粒子によって構成される高次構造が示す光学特性について、DDA法を利用した数値解析を実施した。

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

金ナノ微粒子がナノギャップを隔てて接続された金ナノ微粒子の高次構造体の光学特性を、DDA法を用いた電磁界解析ソフトウェア(DDSCAT)を利用して計算し、実験結果との整合性を調べた。直径20~40nmの金ナノ粒子を800点ほどの双極子で近似し、この金ナノ粒子が1~40nmの間隔を隔てて結合したダイマー構造やトリマー構造さらにはテトラマー構造について、その光学特性を紫外光から近赤外光までの波長300nm~3000nmの範囲で計算した。さらに、これらの金ナノ構造体がガラスやシリコン基板表面に固定されている状態を想定した場合の光学特性の変化につい

ても詳細に調べた。

実際の数値解析では、DDSCATのバージョンアップに伴いソフトウェアの再インストールが必要となったが、HOKUSAIではコンパイル時にソースコードの修正が必要となり、その修正に時間を要した結果、実際の数値計算開始に遅れが生じた。

### 3. 計算の結果

数値計算開始の遅れに伴い、本報告書の執筆段階では、まだ完全な計算結果が得られていないが、金ナノ微粒子のトリマー構造やテトラマー構造では、光波の磁場成分との結合効率が高くなり、ダイマー構造と比較して磁気相互作用が大きくなることがわかった。

DNAを用いた金ナノ微粒子を結合させて作製した金ナノトリマー構造の分光計測実験で得られたスペクトルデータでは、トリマー構造の形成に伴って金ナノ微粒子の表面プラズモン共鳴による吸収線が2つに分離することを確認している。数値計算の結果は、この現象を高い精度で再現できていることを確認した。

### 4. まとめ

DDA法を用いた大規模計算により、金ナノ微粒子の高次構造体の光学特性についても高い精度で解析できる事がわかった。

### 5. 今後の計画・展望

今後は、多数の金ナノ粒子が結合した複雑な構造を持つ物体の電磁界解析に加え、これらの構造体が違いに相互作用し合う状況についても数値計算を実施して、メタマテリアルとして最適な構造設計や実験条件の最適化を行う予定である。